

中性粒子ビームの生成メカニズムの シミュレーション

みずほ情報総研(株)¹ BEANS研究所² 東京大学³ 東北大学⁴

○渡辺尚貴¹ 大塚晋吾¹ 小野耕平¹ 入江康郎¹

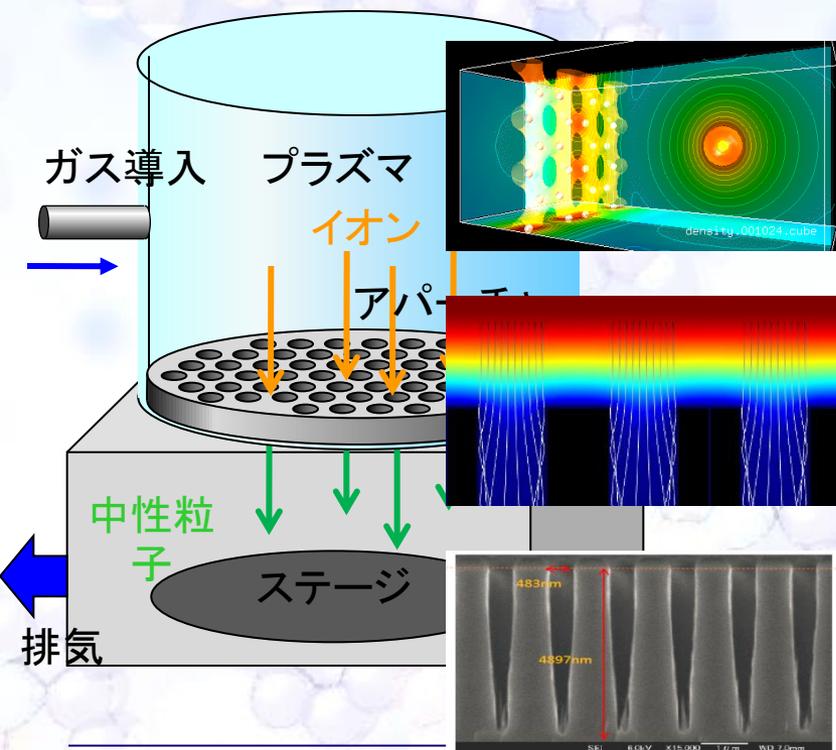
杉山正和^{2,3} 久保田智広^{2,4} 寒川誠二^{2,4}

2014年2月4日 MemsONE技術交流会

中性粒子ビームの数値シミュレーション

装置の概要

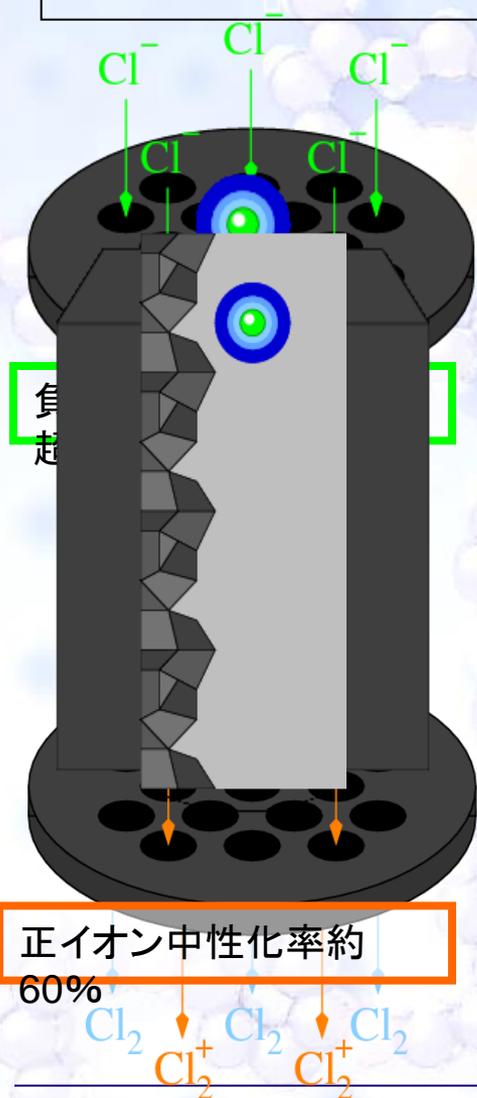
- 印加バイアスでイオンをアパーチャへ誘導
- アパーチャ側壁にイオンが衝突して中性化
- 中性粒子で高精度エッチングを実現



数値シミュレーションの構成

- イオンの中性化率の予測
イオンとアパーチャ間の電子移動を計算
- 中性粒子ビームの角度分布の予測
シース電界・衝突のイオン軌道を計算
- 中性粒子ビームのエッチング形状の予測
表面反応モデルでエッチング過程を計算

中性化率の予測シミュレーション



実験の事実

- アパーチャ通過粒子が中性化
- 正負イオンで異なる中性化率

現象の推測

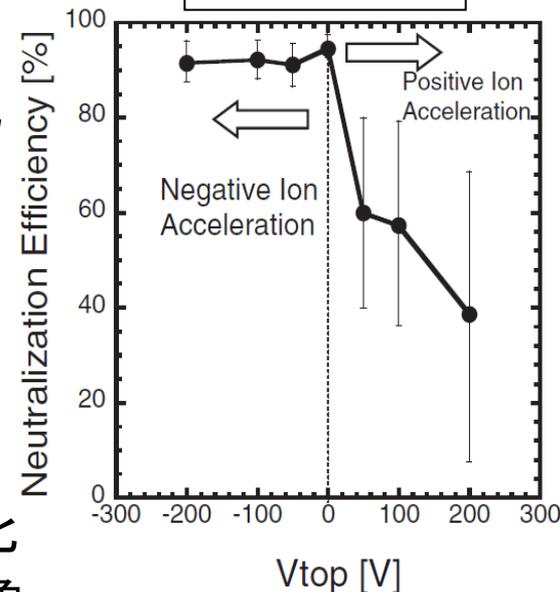
- アパーチャ側壁とイオンの衝突時に電子が移動して中性化
- 電子の移動は量子力学的現象

計算の目的

- 量子電子動力学計算で中性化のメカニズムを理解する
- 高中性化率となるイオンとアパーチャの材料を探す

正イオン中性化率約
60%

実験事実



S. Samukawa, J. J. Appl. Phys. **45**, 2395 (2006)

電子移動の量子力学計算モデル

計算系

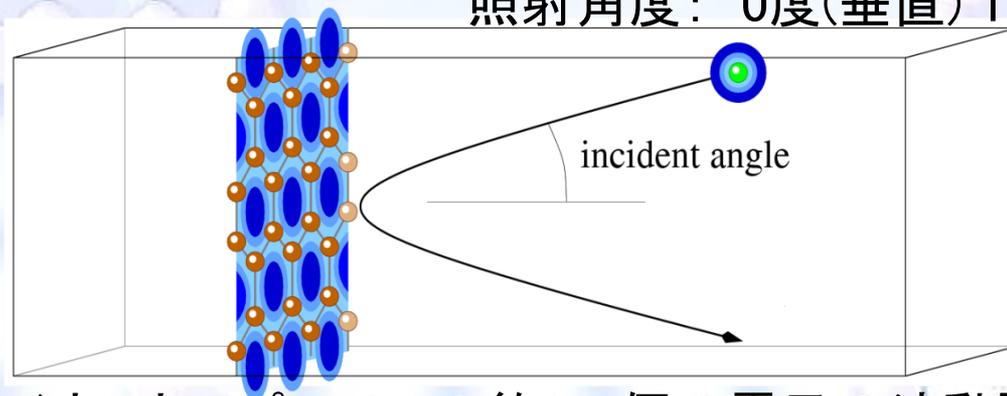
アパーチャ基板:

炭素24原子のグラファイト

照射粒子: Cl^- Cl Cl_2^+ Cl_2

照射速度: 12eV 25eV 50eV 100eV

照射角度: 0度(垂直) 15度 30度 45度 60度



計算内容

衝突過程でのイオンとアパーチャの約100個の電子の波動関数の数100fsecの時間発展を時間依存Kohn-Sham方程式に基づいて量子力学的に数値計算した。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_n(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{ions}}^{\text{PP}}(\mathbf{r}, t) + V_{\text{HXC}}[\rho(t)] \right] \phi_n(\mathbf{r}, t); \quad \rho(\mathbf{r}, t) = \sum_n |\phi_n(\mathbf{r}, t)|^2$$

長時間発展を安定かつ高速に計算する量子電子動力学シミュレータを開発した。

量子電子動力学シミュレータ

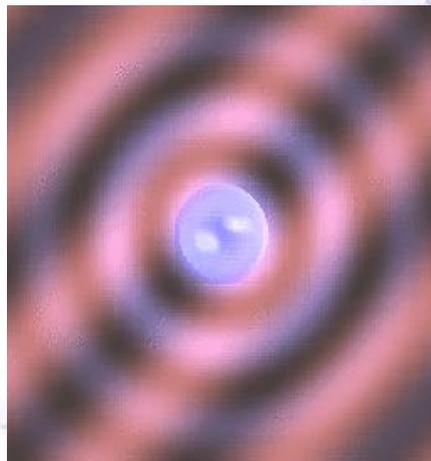
実空間・実時間法で空間に広がる波動関数の時間発展を計算
超長時間の時間発展計算が可能な独自アルゴリズムを実装

$$\varphi_n(\mathbf{r}, t + \Delta t) \cong \exp\left[\frac{i\Delta t}{4}\Delta\right] \exp\left[-i\Delta t\left(V_{\text{int}}[\rho'] + V_{\text{ext}}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)\right)\right] \exp\left[\frac{i\Delta t}{4}\Delta\right] \varphi_n(\mathbf{r}, t)$$

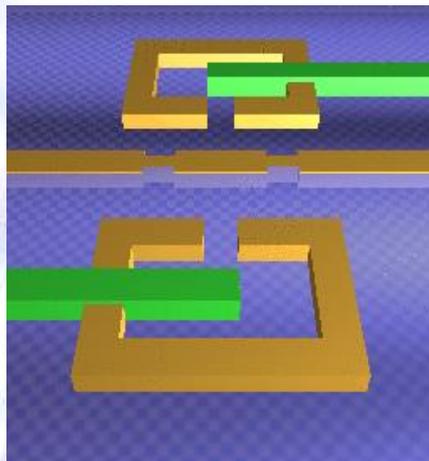
N. Watanabe and M. Tsukada, P.R.E, Vol 62, No 2, 2914 (2000)、P.R.E, Vol 65, No 3, 036705 (2002).

<http://www.mizuho-ir.co.jp/solution/research/semiconductor/nano>

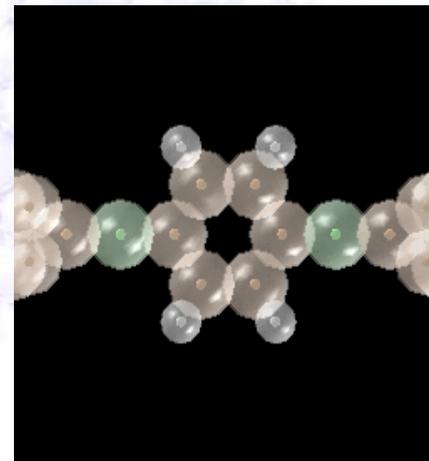
応用分野:



分子の非線形光学応答



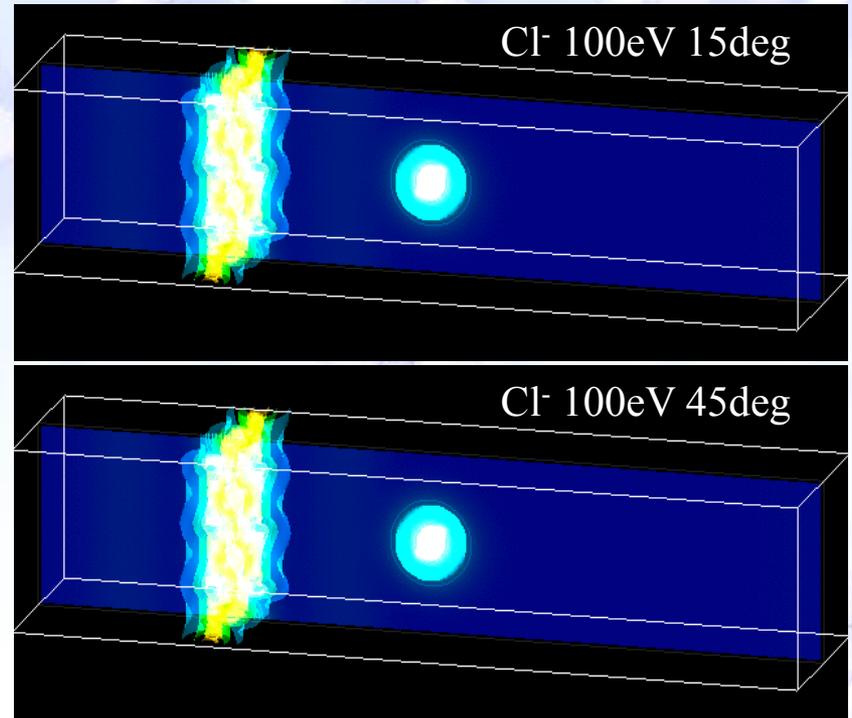
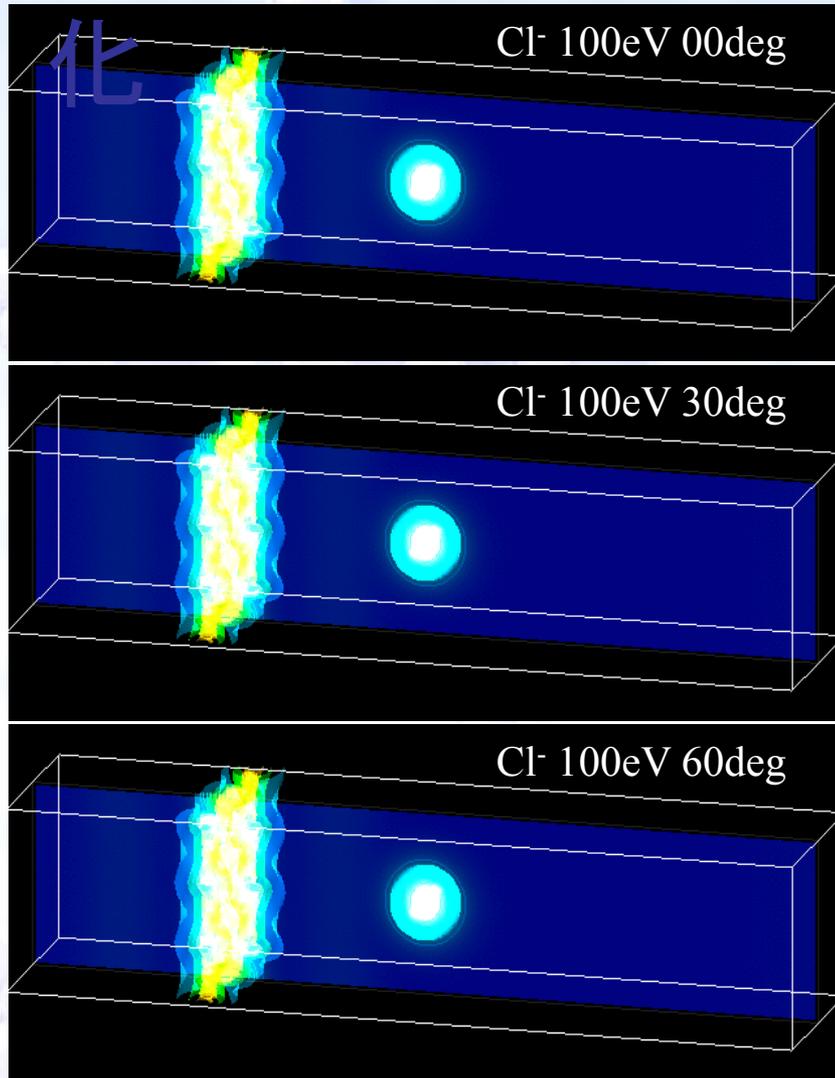
超微細回路の超高速応答



分子回路の交流電流特性

衝突過程での電子密度分布の時間変化

化

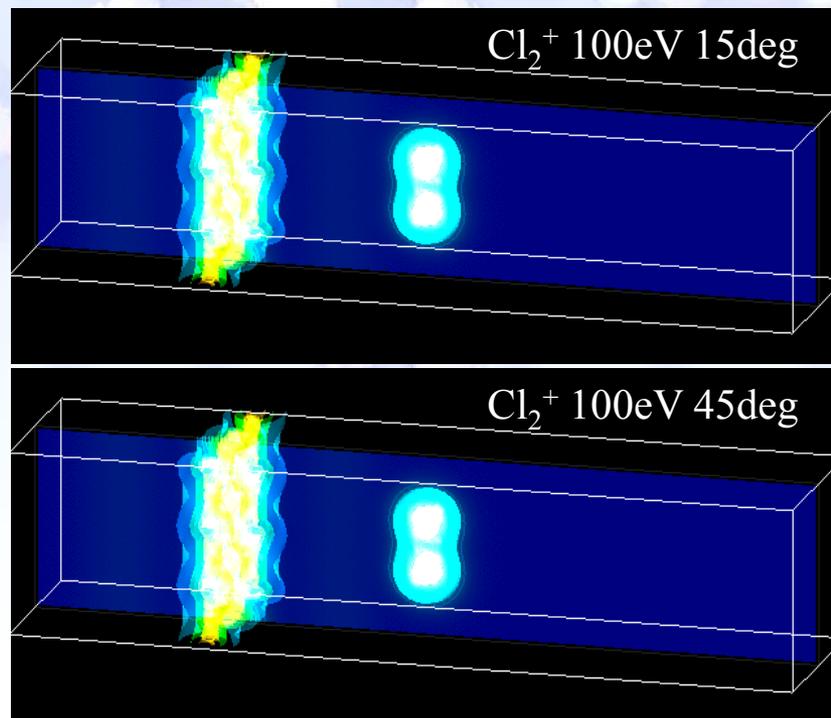
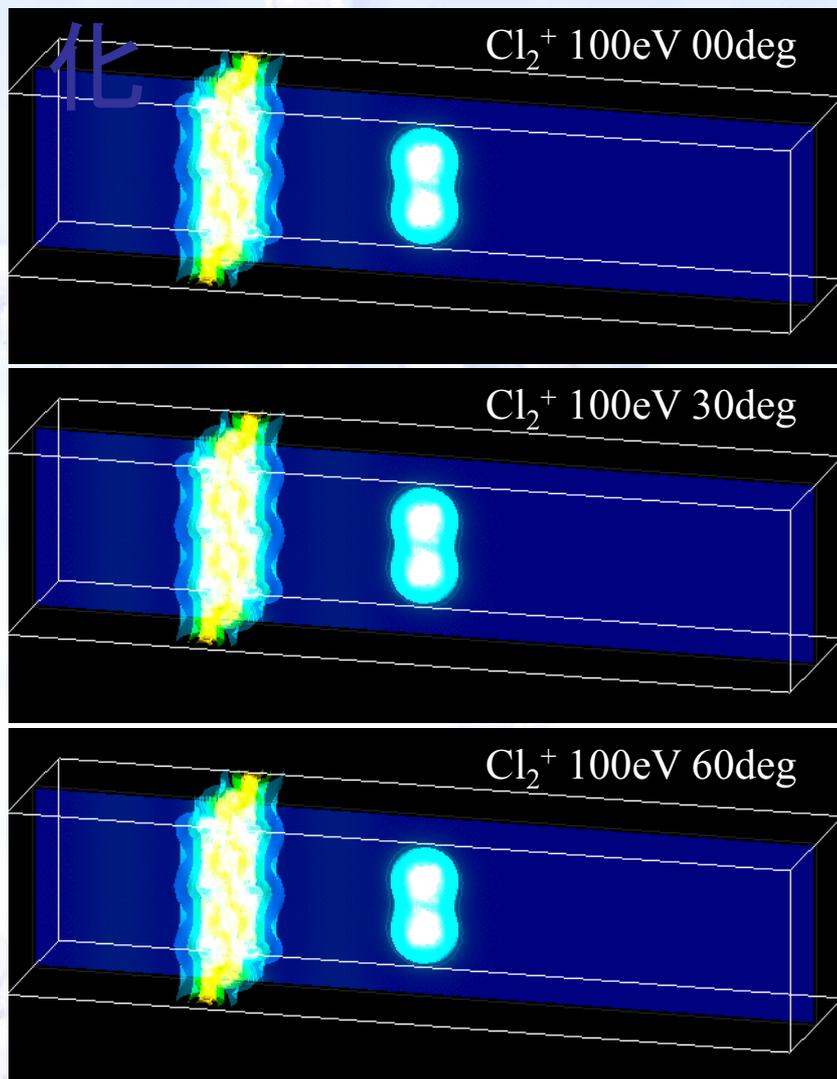


$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_n |\phi_n(\mathbf{r}, t)|^2$$

粒子の電子と基板の電子が交換。

不均衡な交換で粒子の電子数が変化。

衝突過程での電子密度分布の時間変化



$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_n |\phi_n(\mathbf{r}, t)|^2$$

粒子の電子と基板の電子が交換。

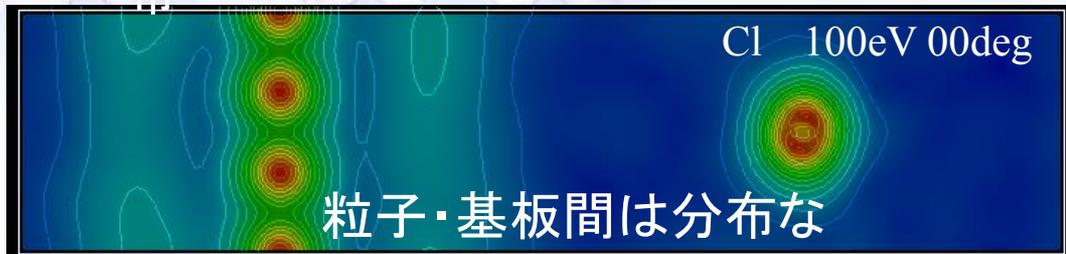
不均衡な交換で粒子の電子数が変化。

衝突後の粒子の価電子数の評価

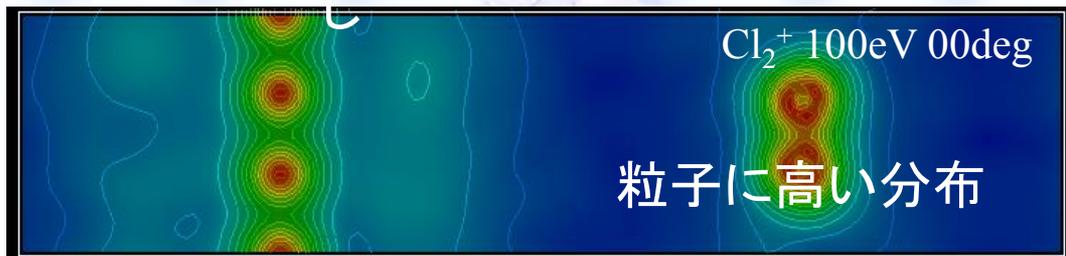


粒子周辺の空間で分布を積分

$$\langle N \rangle = \int_{\text{particle}} \rho(r) dV$$



これは量子力学の期待値の意味での粒子の価電子数。



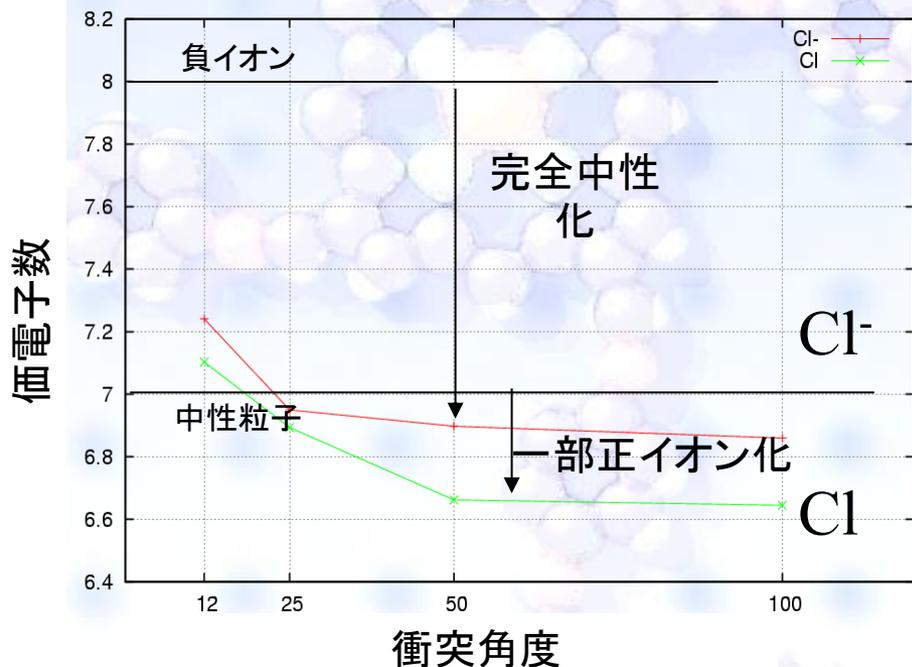
確率的な中性化率と関連



$$\langle N \rangle = P_{\text{neutral}} N_{\text{neutral}} + P_{\text{ionic}} N_{\text{ionic}}$$

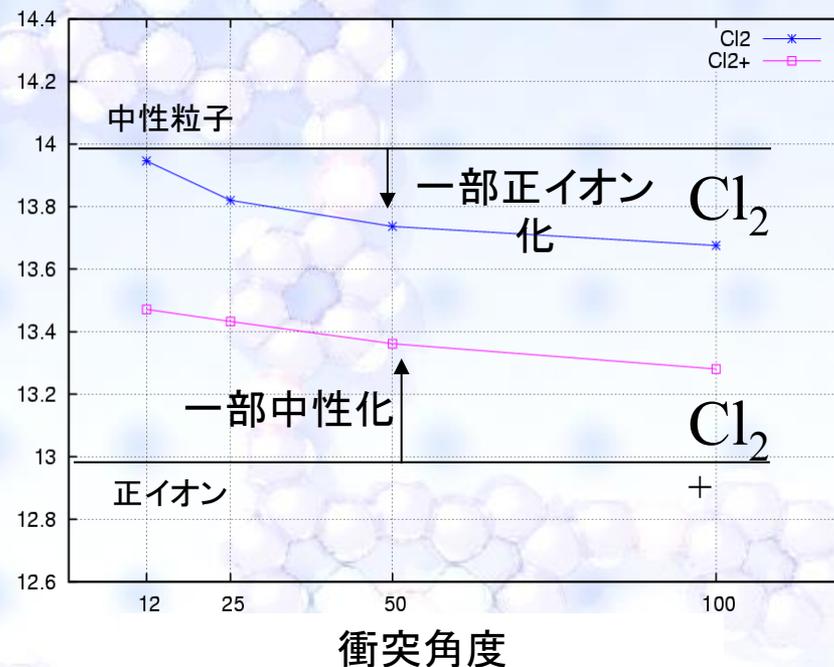
衝突後の価電子数の期待値

Cl-/Cl on graphite



価電子数

Cl2/Cl2+ on graphite



Cl⁻の価電子数は8個から7以下に減少。完全な中性化を示す。

Clの価電子数は7個からさらに減少。衝突の衝撃で電子を落とす。

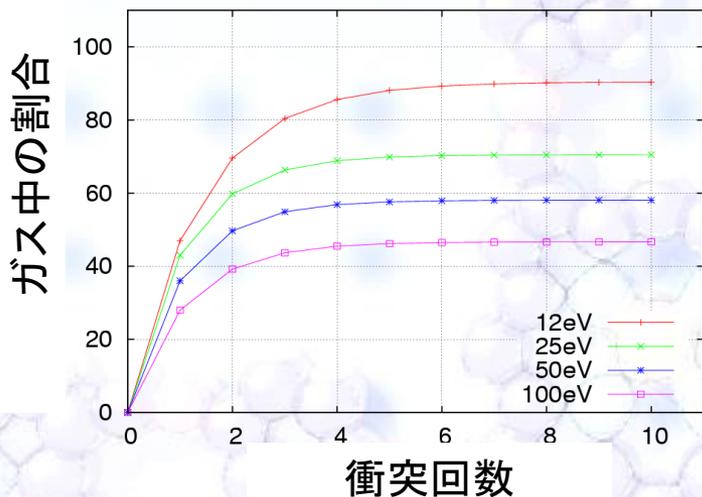
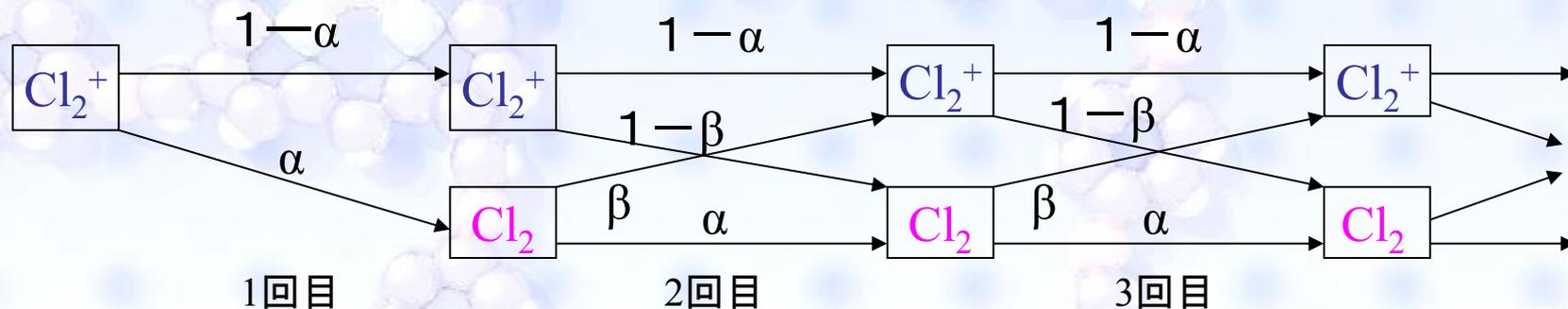
Cl₂の価電子数は14個から微減。低確率で正イオンに変化。

Cl₂⁺の価電子数は13個から微増。低確率で中性化。

Cl₂⁺の多重衝突の効果

粒子はアパーチャ通過時に側壁に多数回衝突する。

Cl₂⁺は確率 α で中性化しても2回目の衝突で確率 β でイオン化する。

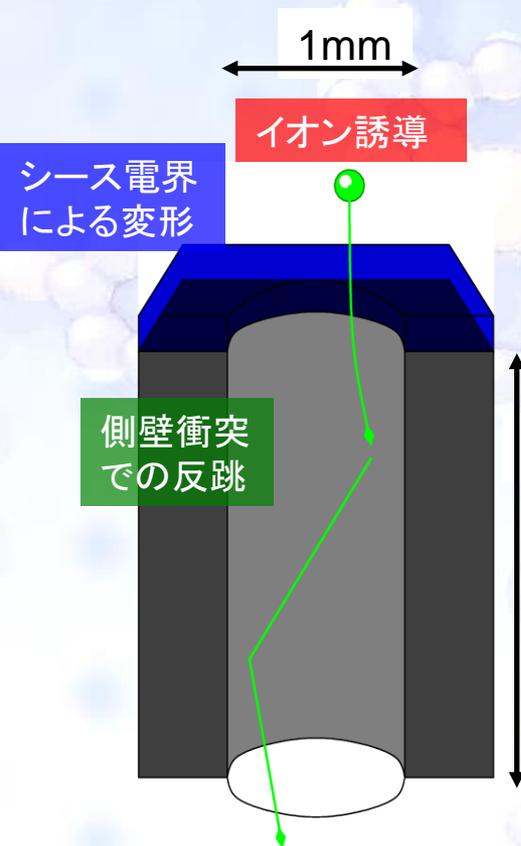


Cl₂⁺は中性化と再イオン化を繰り返し、徐々に中性化。

Cl₂⁺の中性化率は、
100eVで約50%、12eVで約90%

低エネルギーかつ2,3回衝突で高中性化。

粒子の角度分布の予測シミュレーション



装置の設定

- 印加バイアスでイオンをアパーチャ上部に誘導
- アパーチャ上部にはシース電界が発生
- イオンはアパーチャ側壁に衝突して中性化
- 中性粒子はコリメートされてアパーチャから出力

現象の推測

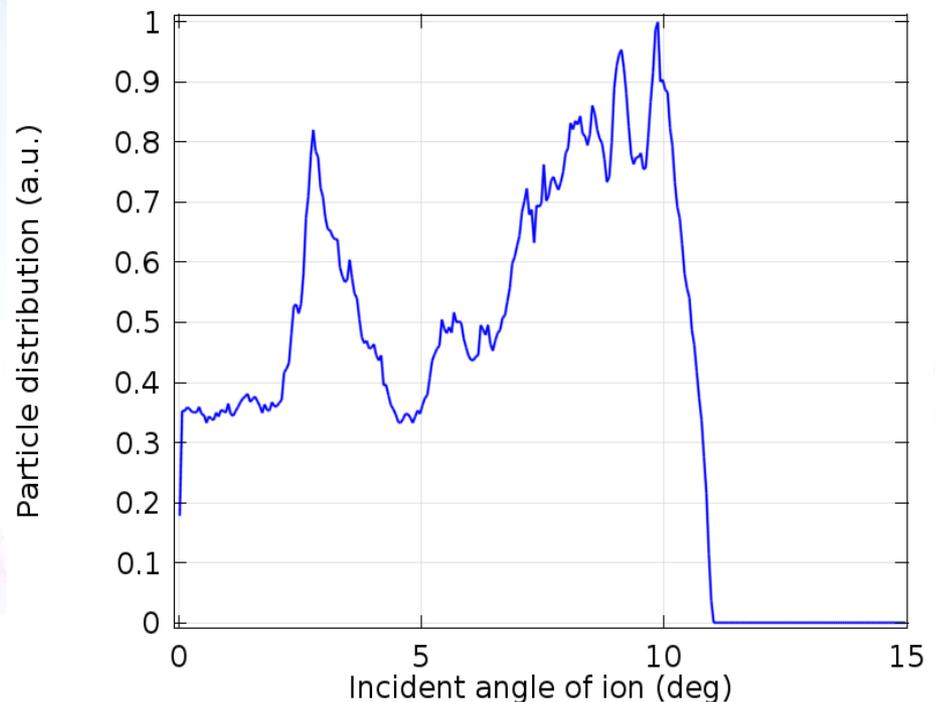
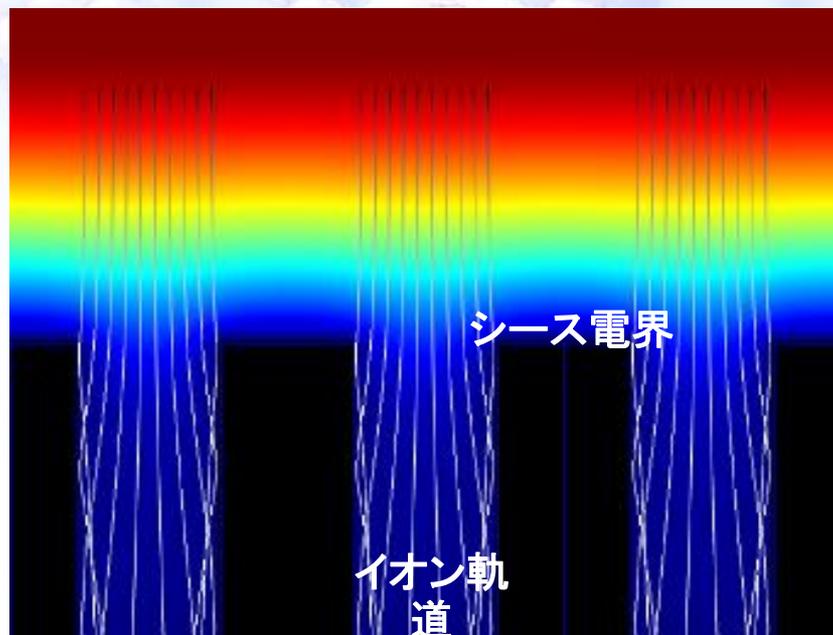
- シース電界でイオン軌道が変形
- 曲がるため側壁に衝突して中性化
- 非弾性衝突のためエネルギーが低下
- アパーチャのアスペクト比で出力角度がコリメート

計算の目的

- 粒子軌道計算で中性粒子ビームの出力角度分布を計算
- 指向性が高くなるアパーチャ形状を探す

アパーチャ進入角度の分布の計算

アパーチャ上部にはシース電界が発生し、加速イオンの軌道が曲がる。
シース電界とイオン軌道を計算し、アパーチャ進入時の角度分布を計算。

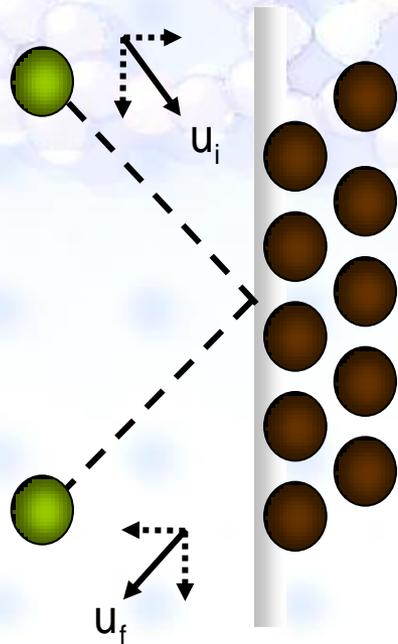


計算されたシース電界とイオン軌道。
イオン軌道は曲がり、側壁に衝突できるようになる。

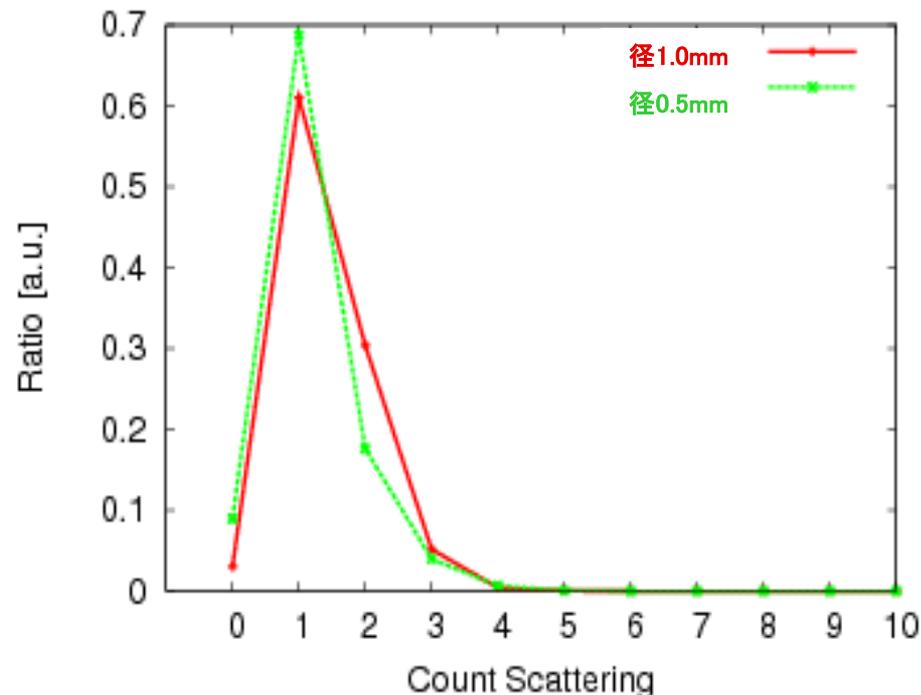
計算されたイオンの進入時の角度分布。
シース電界により10度程度に広がる。

アパーチャ衝突回数の分布の計算

曲がって進入したイオンはアパーチャ通過中に側壁と非弾性衝突を繰り返す。非弾性衝突を二体散乱近似モデルで計算し、アパーチャ通過中の衝突回数を計算。



二体散乱近似モデル：粒子は壁内の多数の原子と確率的に衝突し、エネルギーを失って反射する確率モデル。

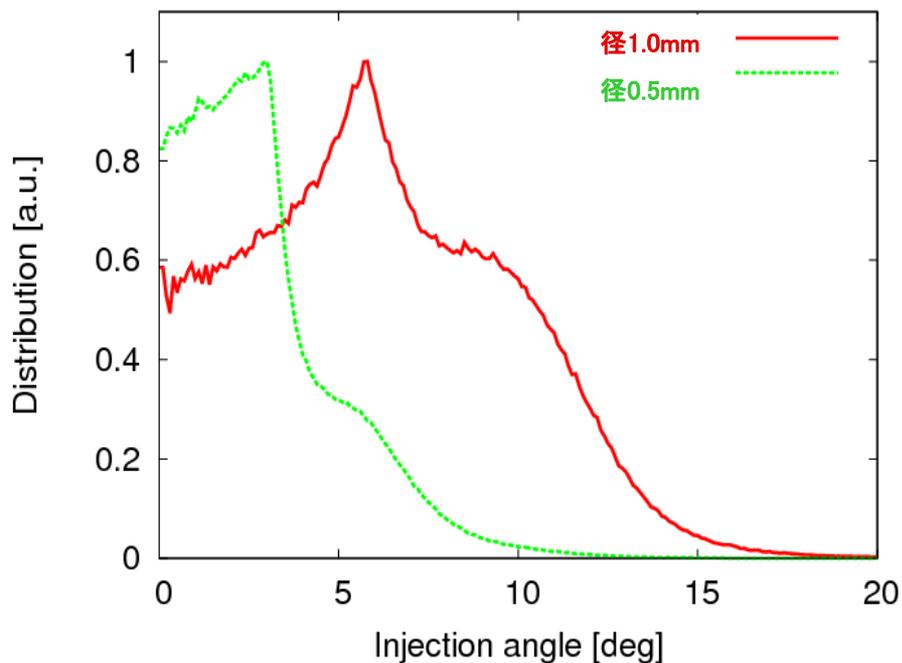


計算された粒子の側壁との衝突回数の分布。粒子は1、2回は側壁に衝突する。

アパーチャ出力角度の分布の計算

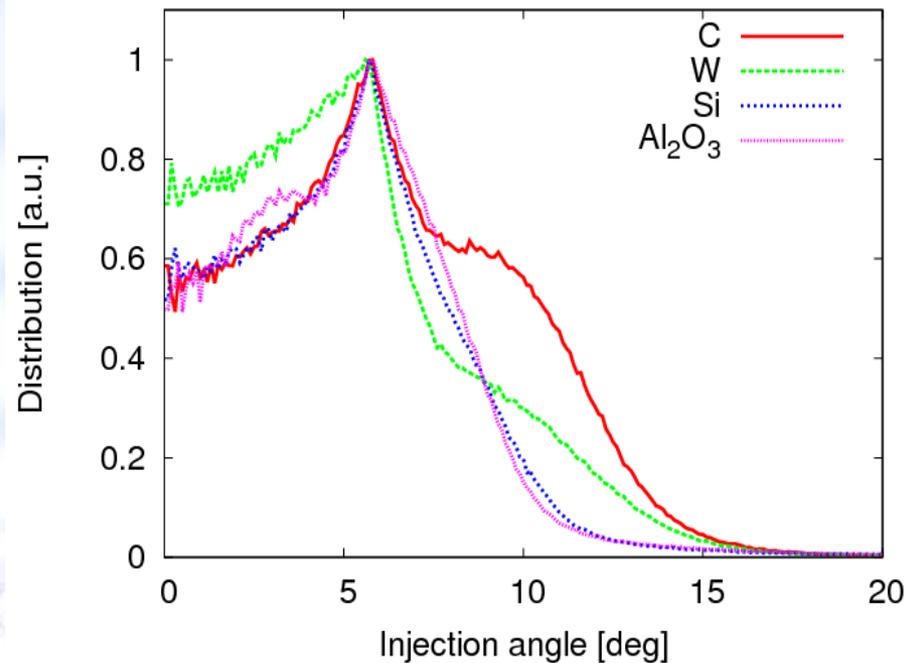
アパーチャ出力時の中性粒子の角度分布を計算。

アパーチャ径を変えての計算



アパーチャ出力時の中性粒子の角度分布。
径を細くすると通過角度が狭まる。

アパーチャプレートの材質を変えての計算



アパーチャ出力時の中性粒子の角度分布。
重元素にすると通過角度が狭まる。

まとめ

第一原理電子状態計算でイオンの中性化率を予測した。

- 負イオンの高い中性化率：電子がイオンから落ち易いため。
- 正イオンの低い中性化率：電子がイオンに戻り易いため。

粒子軌道計算で中性粒子のアパーチャ通過軌道を予測した。

- シース電界によってイオンはアパーチャ側壁に1,2回衝突する。
- アパーチャのアスペクト比に応じて出力角度はコリーメートされる。